

Numéro 1 Juin 2007

L'IFP travaille depuis toujours à l'interface entre recherche fondamentale et industrie. La lettre d'information Science@ifp souligne les résultats scientifiques qui nous placent en position d'atteindre nos objectifs industriels.

La recherche de l'IFP couvre l'ensemble de la chaîne "énergie". Illustrations : falaises de grès et connaissance des réservoirs pétroliers ; complexe catalytique de la métathèse des oléfines et mécanisme d'Yves Chauvin, prix Nobel de Chimie en 2005 pour cette découverte faite à l'IFP ; moteurs à explosion économes et peu polluants ; unité de production de biocarburants et diversification des carburants ; captage et stockage de CO₂ dans un aquifère profond.

Les rubriques seront courtes, accompagnées d'illustrations probantes, de références d'articles scientifiques et d'un contact pour ceux qui veulent en savoir plus. Bonne lecture !

Olivier Appert
Président

L'IFP est un organisme public de recherche et de formation, à l'expertise internationalement reconnue, dont la mission est de développer les énergies du transport du XXI^e siècle.

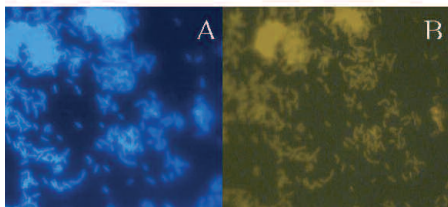
Biodégradation des éthers-carburants

Le méthyl *tert*-butyl éther (MTBE, [CH₃]₃COCH₃) ou l'éthyl *tert*-butyl éther (ETBE, [CH₃]₃COC₂H₅) sont ajoutés aux essences pour obtenir l'indice d'octane requis et diminuer les émissions de polluants gazeux. Ces composés sont très solubles dans l'eau et ils résistent à la biodégradation : ils détérioreraient donc la qualité des eaux en cas de pollution de nappes aquifères. L'isolement de bactéries ayant la capacité de croissance sur ces composés permet l'étude des voies de biodégradation du MTBE ou de l'ETBE

(intermédiaires de dégradation, enzymes et gènes impliqués, contrôle de leur expression).

En collaboration avec l'Institut Pasteur (Paris) et le Biotechnology Research Institute (BRI, Montréal), l'IFP a été le premier à caractériser plusieurs gènes impliqués. Ces gènes et bactéries servent à la mise au point d'outils nouveaux :

- des puces à ADN pour mettre en évidence les micro-organismes qui ont la capacité de dégrader ces éthers (collaboration BRI) ;
- des biocapteurs pour détecter le MTBE et l'ETBE dans l'eau (collaboration Université de Knoxville, USA) ;
- des procédés pour dépolluer les aquifères (collaboration BRI). ■



Mycobacterium austroafricanum IFP 2012 photographié après marquage par un colorant universel (A) ou après marquage par une sonde nucléique fluorescente (B).

François A., Mathis H., Godefroy D., Piveteau P., Fayolle F., Monot F., *Appl. Environ. Microbiol.* 68:2754-2762 (2002)
Lopes Ferreira N., Malandain C., Fayolle-Guichard F., *Appl. Microbiol. Biotechnol.* 72:252-262 (2006).

contact scientifique :
francoise.fayolle@ifp.fr

Biodégradation > P.1

Biodégradation des éthers-carburants.

Mélanges > P.2

Sédimentation, Structuration.

Analogues géologiques > P.2

Du bac de sable à la chaîne de montagne.

Analyse biomasse > P.3

Chromatographie bidimensionnelle de la biomasse.

Quantique > P.3

Calculs quantiques et optimisation des catalyseurs d'hydro-désulfuration.

Large Eddy Simulation > P.4

Simulation "LES" de la combustion turbulente dans les moteurs à piston.

Sédimentation, Structuration

Les mélanges de particules solides dans des liquides sont très courants dans nombre d'applications. L'étude de la stabilité de telles dispersions est un point essentiel pour les applications, notamment pétrolières.

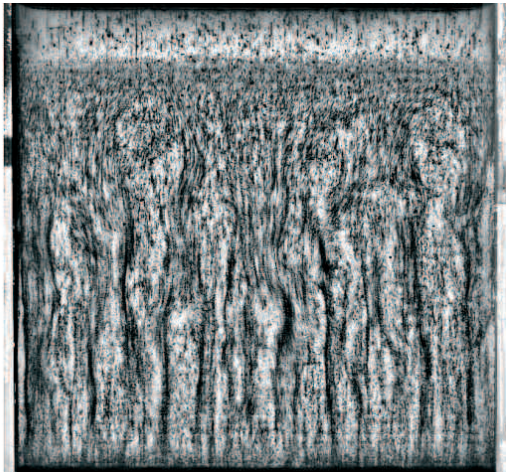


Fig 1 : Structuration verticale lors de la sédimentation de particules dans un fluide rhéofluidifiant thixotrope.

En effet, ces mélanges sont par nature instables : la phase solide sédimente. Ce phénomène présente une richesse scientifique étonnante par rapport à la simplicité apparente du problème. Ainsi, même dans le cas le plus simple d'un fluide Newtonien et de particules de même taille, la présence d'une paroi peut-elle provoquer un écoulement additionnel de convection d'ensemble du mélange¹. Dans le cas des fluides non-Newtoniens, structuration et agrégation hydrodynamiques entre particules peuvent apparaître pendant l'écoulement (Fig. 1).

Autre exemple, la sédimentation d'une bille unique dans une dispersion de laponite (argile synthétique) conduit à un champ de vitesse inédit : au-dessus de la particule, le fluide remonte.

Cette "traînée négative", mesurée expérimentalement (Fig. 2) par vélocimétrie par image de particules

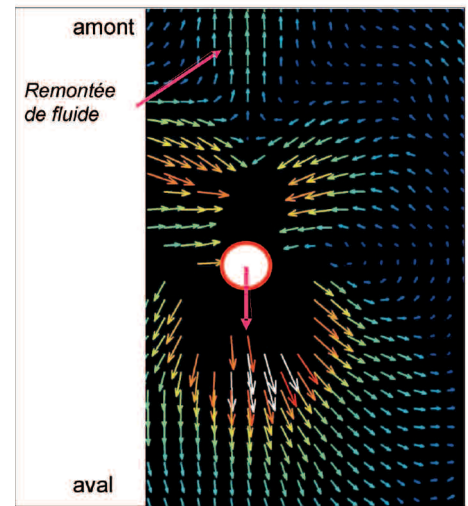


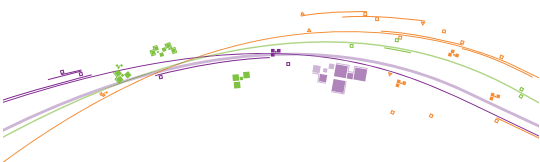
Fig 2 : mesure expérimentale des vitesses dans le référentiel du laboratoire.

(PIV), est liée à la rhéologie des fluides à seuil qui ont un comportement intermédiaire entre solide et liquide (collaboration IFP-Université Paris XI²).

1. Peysson Y., Guazzelli E., *Phys. Fluids* 10 (1) 44-54 (1998).

2. Gueslin B., Talini L., Herzhaft B., Peysson Y., Allain C., *Phys. Rev. E* 74 (4) art N°42501 (2006).

contact scientifique :
yannick.peysson@ifp.fr



Depuis une quinzaine d'années, l'IFP utilise la modélisation analogique afin de reproduire en laboratoire les processus physiques qui contrôlent l'évolution des structures géologiques.

L'IFP a développé une compétence originale dans ce domaine, grâce à l'utilisation d'un scanner médical qui permet de suivre l'évolution 4D du modèle par tomographie aux rayons X.

Actuellement, cet outil est utilisé pour développer et valider des logiciels de restauration 3D dans des contextes tectoniques variés, analyser les interactions entre structures salifères et plissement, et comprendre la dynamique des fronts de chaînes de montagnes. Cette approche permet par exemple de relier la géométrie 3D des plis du Fars dans le Zagros iranien

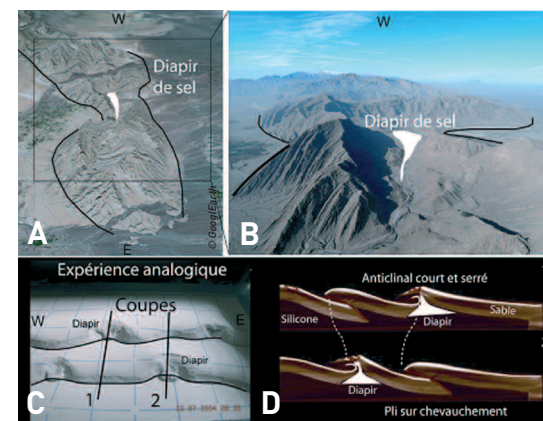
avec la présence de dômes de sel dans la série sédimentaire. On observe en effet que le raccourcissement se concentre dans le dôme ou diapir de sel, causant son éjection, tandis qu'il se distribue de part et d'autre en plissement classique.

Colletta B., Letouzey J., Pinedo R., Ballard JF. and Bale P., 1991, Computerized X-ray tomography analysis of sand box models: examples of thin-skinned thrust system, *Geology*, 19, pp.1063-1067.

Callot JP., Jahani S., and Letouzey J., 2007, The role of pre-existing diapirs in fold and thrust belt development, in *Thrust belts and foreland basins: from fold kinematics to hydrocarbon systems*, eds. Lacombe O., Lavé J., Roure F. and Verges J., Springer-Verlag, pp. 309-325.

contact scientifique :
j-paul.callot@ifp.fr

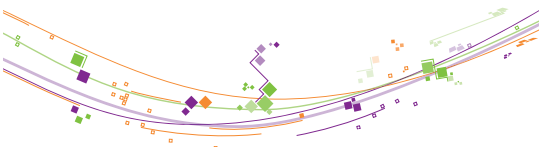
Du bac de sable à la chaîne de montagne



Anticlinale d'Ahmadi : contour noir sur l'image satellite A et en vue aérienne B, montrant une constriction marquée au niveau d'un dôme de sel préexistant. En vue "aérienne" C et en coupe D : expérience analogique montrant la relation directe entre un dôme préexistant et la constriction des anticlinaux ; la gomme de silicone simule le sel et le sable simule les sédiments.

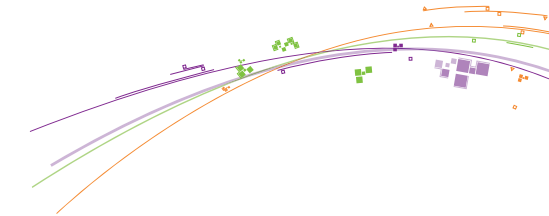
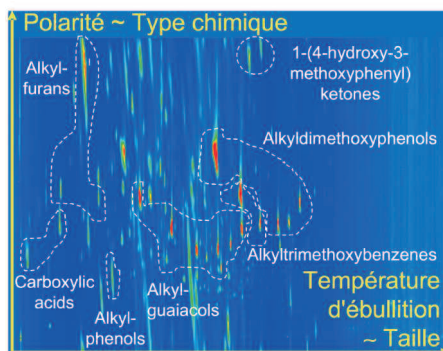
Chromatographie bidimensionnelle de la biomasse

L'essor de nouvelles sources d'énergie, renouvelables et préservant durablement l'environnement, constitue un enjeu sociétal majeur. Dans cette perspective, représenter au



niveau moléculaire la biomasse et ses dérivés est l'une des étapes essentielles pour la conception de procédés de transformation efficaces, permettant la valorisation de ces matières dans le pool carburant. L'IFP a récemment pu établir une cartographie moléculaire fortement innovante des espèces constituant des huiles de pyrolyse, grâce à la chromatographie gazeuse bidimensionnelle (GC-2D, voir Figure) couplée à la spectrométrie de masse et à la mise en œuvre

d'outils informatiques puissants. Ainsi, les structures chimiques principales ont pu être élucidées, aidant à la conception des modèles cinétiques et des procédés. Cette avancée a pu être obtenue grâce à la multidisciplinarité des équipes IFP et aux performances des outils analytiques développés depuis quelques années, en collaboration avec le CNRS et l'ESPCI. ■



Vendeuvre C., Bertoncini F., Duval L., Duplan J.L., Thiebaut D., Hennion M.C., *J. Chromatography A* 1056 (1-2): 155-162, Nov 12, 2004.

Adam F., Bertoncini F., Brodusch N., Durand E., Espinat D., Thiebaut D., Hennion M.C. *J. Chromatography A* 1148 (1):55-64, April 27, 2007.

contact scientifique :
fabrice.bertoncini@ifp.fr

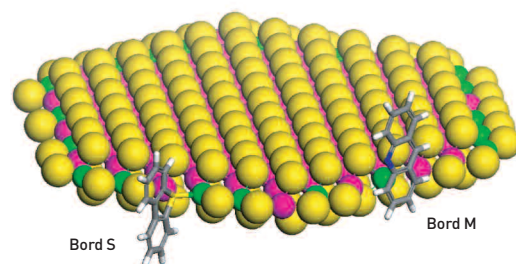
En GC-2D, l'échantillon à analyser est soumis à deux séparations chromatographiques, dites "orthogonales" car indépendantes, en fonction de la volatilité (1^{re} dimension) et de la polarité (2^e dimension) des composés. Chaque trace de couleur représente une des molécules principales constituant une bio-huile issue de feuillus. Elles s'organisent en familles (traits pointillés).

Calculs quantiques et optimisation des catalyseurs d'hydrodésulfuration

L'hydrodésulfuration des coupes pétrolières a pour but l'élimination du soufre organique présent naturellement dans les pétroles bruts, afin de produire des carburants "propres" et de limiter l'émission d'oxydes de soufre. Les normes européennes imposeront un maximum de 10 ppm en 2010, soit un millième de la teneur du brut type. Qu'il s'agisse de carburants d'origine fossile ou issus de la biomasse, le procédé de raffinage utilise des catalyseurs à base de nanocristallites de sulfures de molybdène (MoS₂) promus par du cobalt (Co) ou du nickel (Ni). Il est connu empiriquement que la localisation des promoteurs Co et Ni et la morphologie des cristallites actifs sont essentielles (activité centuplée), mais l'approche expérimentale ne permet pas de déterminer ces facteurs sans ambiguïté.

En revanche, les calculs quantiques (DFT, logiciel VASP, Université de Vienne) combinés à la thermodynamique des surfaces et interfaces¹ ont permis de lever les doutes : le milieu réactionnel et la température agissent sur les énergies de surface des nanocristallites de MoS₂, ainsi que sur la nature des sites atomiques de surface. Les atomes de "promoteurs" Co et Ni modulent la forme et la taille des nanocristallites par effet tensio-actif.

Ces informations ont permis d'interpréter des expériences de microscopie à effet tunnel danoises. Elles sont cruciales pour orienter et optimiser la préparation et l'activation des catalyseurs. Ces résultats ont été généralisés² avec l'Université Paris VI au cas de nanocristallites supportées sur alumine et anatase. ■



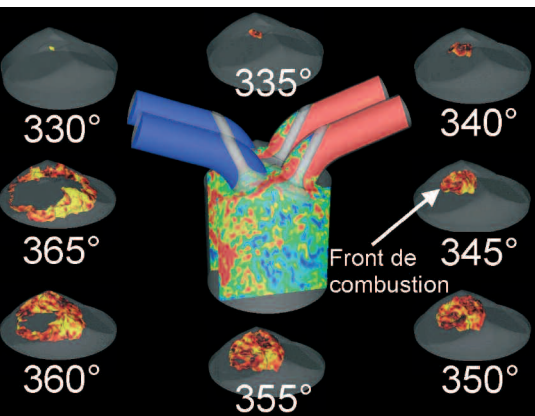
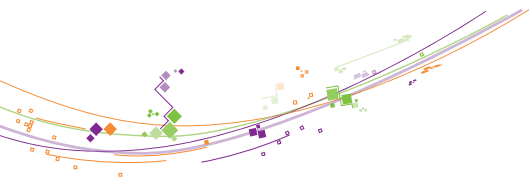
Modèle atomistique (vue perspective) d'une particule active de sulfure mixte CoMoS en interaction avec du dibenzothiophène sur un bord de type "S" et de l'acridine sur un bord de type "M" (H: blanc, C: gris, S: jaune, N: bleu, Co: vert, Mo: magenta).

1. Schweiger H., Raybaud P., Kresse G., et Toulhoat H., *J. of Catalysis*, 207, 76-87, (2002).

2. Costa D., Arrouvel C., Breyse M., Toulhoat H., Raybaud P., *J. of Catalysis* 246, 325-343, (2007).

contact scientifique :
pascal.raybaud@ifp.fr

Simulation "LES" de la combustion turbulente dans les moteurs à piston



Simulation LES d'un moteur à allumage commandé (centre) et front de combustion à degré d'avancement vilebrequin croissant (périphérie).

Depuis les années 1980, l'IFP est très actif dans la modélisation tridimensionnelle de l'écoulement turbulent et de la combustion dans les cylindres des moteurs à piston. La technique RANS (Reynolds Averaged Navier-Stokes) est aujourd'hui très utilisée pour la conception des moteurs au travers du code IFP-C3D. Si elle est bien adaptée à la prédiction de points moteurs stabilisés, elle ne peut décrire les variations cycliques importantes de la combustion observées dans certains modes opératoires. Pour mieux prédire la physique de la turbulence et son influence sur la combustion moteur, l'IFP co-développe avec le CERFACS le code de calcul AVBP, en l'adaptant pour permettre des simulations LES (Large Eddy Simulation) des moteurs à piston. La LES résout explicitement les grands tourbillons présents dans les moteurs et leur influence sur la combustion, et ne modélise que les petites échelles, permettant ainsi de décrire les origines

et les effets des variations cycliques. Il s'agit d'une avancée importante car ces dernières ont une incidence très significative sur des aspects tels que l'instabilité des moteurs, les émissions de polluants, la consommation ou le bruit. Avec le recours à des calculateurs massivement parallèles, on peut envisager l'application de la LES aux moteurs réels comportant plusieurs cylindres. Il s'agit d'une technologie clé pour améliorer le rendement des moteurs avec les différents modes de combustion développés tout en répondant aux exigences accrues des normes d'émissions de polluants. ■

Moureau V., Lartigue G., Sommerer Y., Angelberger C., Colin O. & Poinsot T., J. of Computational Physics 202 (2005), 710-736.

Richard S., Colin O., Vermorel O., Benkenida A., Angelberger C. and Veynante D., Proc. of the Comb. Inst. (2007), doi:10.1016/j.proci.2006.07.086.

contact scientifique :
christian.angelberger@ifp.fr

Colloques

Thermodynamics 2007

[26-28 septembre 2007, IFP]. Conférence internationale organisée avec Imperial College, CNRS, ENSTA, ENSCP, CEA, Universités Paris XI et Paris XIII. Contact : frederique.leandri@ifp.fr

Captage et stockage géologique du CO₂ - Innovation, enjeux industriels et réalisations

[4-5 octobre 2007, Paris]. 2^e symposium international organisé avec l'ADEME et le BRGM. Contact : patricia.fulgoni@ifp.fr

Actes de colloque

Rencontre Scientifique de l'IFP "Molecular Structure of Heavy Oils and Coal Liquefaction Products"

[12-13 avril 2007, IFP-Lyon]. Les actes seront publiés dans Oil & Gas Science and Technology - Revue de l'IFP. <http://ogst.ifp.fr>

Accord cadre IFP-CNRS

Signé en avril 2007, il régit les collaborations touchant aux domaines d'activité de l'IFP, dont exploitation pétrolière et gazière, NTE, stockage CO₂, carburant hydrogène, biomasse.

Ouvrages

"Microbiologie pétrolière"
de Jean-Paul Vandecasteele a été, le 24 janvier dernier, l'un des lauréats du Prix Roberval 2007, recevant une mention spéciale dans la catégorie "Enseignement supérieur".
www.editionstechnip.com

"Les Biocarburants - État des lieux, perspectives et enjeux du développement", rédigé par Daniel Ballerini avec la collaboration de Nathalie Alazard-Toux, a déjà été vendu à plus de 1000 exemplaires.
www.editionstechnip.com

Habilitation à diriger des recherches

• Benjamin Herzhaft
HDR de l'Université de Bretagne Occidentale : "Rhéologie et physico-chimie de fluides complexes dans l'industrie pétrolière" [30/03/07].

• Thierry Gauthier
HDR de l'Université Claude Bernard (Lyon 1) : "Contribution à l'étude des réacteurs en lit fluidisé dans l'industrie du raffinage"

• Axel Pierru
HDR de l'Université Paris I Panthéon-Sorbonne : "De la formalisation de problèmes concrets à des avancées théoriques : contributions en microéconomie, économie de l'environnement, calcul économique et théorie financière" [21/12/06].

www.ifp.fr

Pour prendre contact avec l'IFP ou pour recevoir Science@ifp :

Direction de la Communication -
Tél. : +33 1 47 52 59 00 - Fax : +33 1 47 52 70 96 -
Science@ifp.fr - 1 et 4 avenue de Bois-Préau -
92852 Rueil-Malmaison Cedex - France

Contact presse :

A.-L. de Marignan - Tél. : 01 47 52 62 07

Contact institutionnel :

K. Ragil - Tél. : 01 47 52 58 75

Directeur de la publication : Marco De Michelis • **Rédacteur en chef :** Philippe Ungerer • **Rédacteur en chef adjoint :** Gilles Perrin
Comité éditorial : Denis Babusiaux, Hugues Bédouelle, Pierre Galtier, Alain-Yves Huc, Patrick Lailly, John Lynch, Xavier Montagne, Benoît Noetinger, Christian Ravenne, Yolande Rondot, François Roure, Julie Svay-Lucas, Hervé Toulhoat • Conception graphique : Esquif - N° ISSN : en cours

Science@ifp Numéro 1 • Juin 2007